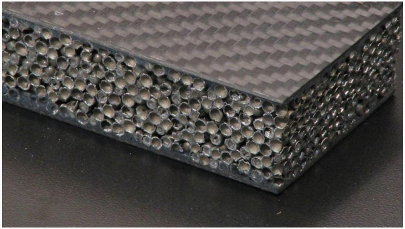
Оценка эффективных механических характеристик материала с микроструктурой

Студент: Дёмин М.Д.
Научный руководитель: Григорьева П.М., доцент ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.
Консультант: Пашковский Д.М., программист НОЦ «Газпромнефть-Политех»

24.06.2024

Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого

Актуальность




- Прогнозирование свойств новых материалов на основе заданной микроструктуры;
- Создание цифровых двойников материалов;

Цель и задачи работы

Цель:
Определение эффективных упругих модулей и предела текучести двухфазного материала с учетом особенностей микроструктуры.

Задачи:

- Подбор набора микроструктурных параметров;
- Выбор схемы учет взаимодействия неоднородностей;
- Решение задачи гомогенизации для двухфазного материала;
- Определение эффективного предела текучести;
- Верификация моделей на экспериментальных данных;

Микроструктурные параметры

- Объемная доля неоднородностей: $\phi = \sum_i \frac{V_i}{V}$, где V_i - объем i-ой неоднородности, V - объем образца;
- Физические свойства изотропных матрицы и неоднородностей: $\mathbf{C}_k = \lambda_k \mathbf{E}\mathbf{E} + 2\mu_k \mathbf{I}$, где k = {0, i} для матрицы и i-ой неоднородности соответственно;
- Параметры формы неоднородностей: a_i, b_i, c_i;
- Преимущественное направление неоднородностей: $\mathbf{m}$;

Основные соотношения

Рассматривается задача теории упругости:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \boldsymbol{f} = 0$$

Закон Гука:

$$\boldsymbol{\sigma} = C_{eff} \cdot\cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = S_{eff} \cdot\cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad C_{eff} = S_{eff}^{-1}$$

где C_{eff} - тензор упругих модулей, S_{eff} - тензор податливости.
Операция осреднения:

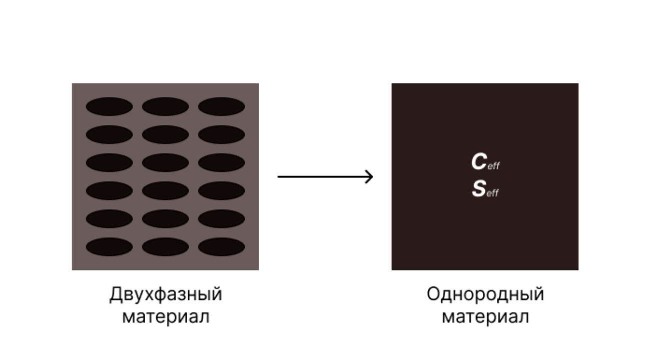
$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{V} \int\limits_V \ldots dV$$

Осреднение тензоров напряжений и деформаций:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{V - \sum_i V_i}{V} \langle \boldsymbol{\varepsilon}_m \rangle + \sum_i \frac{V_i}{V} \langle \boldsymbol{\varepsilon}_{in}^i \rangle$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{V - \sum_i V_i}{V} \langle \boldsymbol{\sigma}_m \rangle + \sum_i \frac{V_i}{V} \langle \boldsymbol{\sigma}_{in}^i \rangle$$

Общая схема задачи гомогенизации:

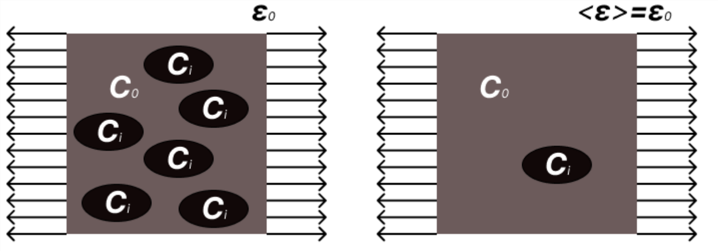


В результате получены следующие выражения для C_{eff} и S_{eff}:

$$C_{eff} = F(\phi, a, b, c, \mu_i, \lambda_i, \boldsymbol{m})$$

$$S_{eff} = F(\phi, a, b, c, \mu_i, \lambda_i, \boldsymbol{m})$$

Схема без учета взаимодействия неоднородностей



Закон Гука для матрицы и неоднородностей:

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_m \rangle = C_0 \cdot \cdot \langle \varepsilon_m \rangle, \quad \langle \boldsymbol{\sigma}^i_{in} \rangle = C_i \cdot \cdot \langle \varepsilon^i_{in} \rangle$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \left[C_0 + \phi (C_1 - C_0) \cdot \cdot \boldsymbol{\Lambda}_\varepsilon \right] \cdot \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$$

где $\boldsymbol{\Lambda}_\varepsilon = \left[I + P \cdot \cdot (C_1 - C_0) \right]^{-1}$ - тензор концентрации деформаций.

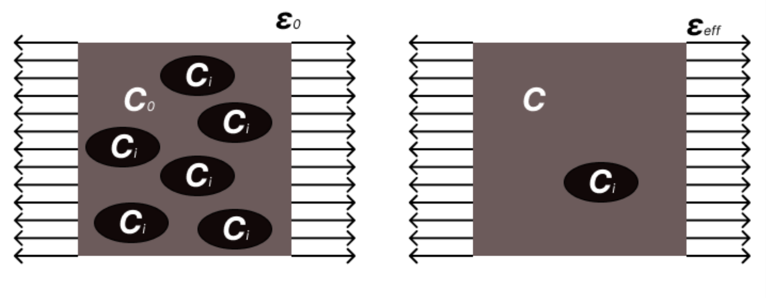
Эффективные тензоры упругих модулей и податливости:

$$C_{eff} = C_0 + \phi (C_1 - C_0) \cdot \cdot \boldsymbol{\Lambda}_\varepsilon$$

$$S_{eff} = S_0 + \phi (S_1 - S_0) \cdot \cdot \boldsymbol{\Lambda}_\sigma$$

Энергетические схемы учета взаимодействия неоднородностей

Идея: помещение неоднородности в некоторое эффективное поле.



Энергетические схемы учета взаимодействия неоднородностей

Схема Мори-Танаки:

Каждая из неоднородностей рассматривается как изолированная и помещается в однородное поле, равное среднему по матрице материала.

$$C_{eff} = C_0 + \left[\phi N\right] \cdot\cdot \left[(1-\phi)I + \phi(C_1 - C_0)^{-1} \cdot\cdot N\right]^{-1}$$

$$S_{eff} = S_0 + \left[\phi H\right] \cdot\cdot \left[(1-\phi)I + \phi(S_1 - S_0)^{-1} \cdot\cdot H\right]^{-1}$$

Схема Канауна-Левина:

Каждая неоднородность окружается некоторой зоной, характеризующей симметрию текстуры. Данная зона не пересекается с соседними.

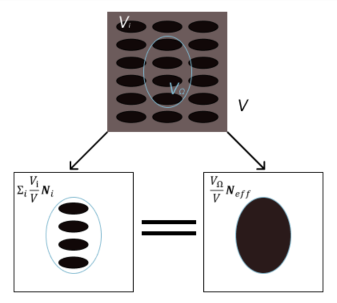
$$C_{eff} = C_0 + \left[\left(\phi N\right)^{-1} - P(\alpha)\right]^{-1}, \quad S_{eff} = S_0 + \left[\left(\phi H\right)^{-1} - Q(\alpha)\right]^{-1}$$

Тензоры вклада жесткости и податливости:

$$N_i = (C_i - C_0) \cdot\cdot \boldsymbol{\Lambda}^i_{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad H_i = (S_i - S_0) \cdot\cdot \boldsymbol{\Lambda}^i_{\boldsymbol{\sigma}}$$

Схема Максвелла

Идея: возмущение поля в удаленной точке, создаваемое группой изолированных неоднородностей, равно возмущению поля в этой точке, создаваемое фиктивной областью Ω.



$$C_{eff} = C_0 + \left[\left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \boldsymbol{N}_i \right)^{-1} - \boldsymbol{P}_\Omega \right]^{-1}$$

$$S_{eff} = S_0 + \left[\left(\frac{1}{V_\Omega} \sum_i V_i \boldsymbol{H}_i \right)^{-1} - \boldsymbol{Q}_\Omega \right]^{-1}$$

Выбор формы области, окружающей неоднородности

Совпадение формы фиктивной области Ω в схеме Максвелла и области, окружающей неоднородность в схеме Канауна-Левина, с формой неоднородности обеспечивает совпадение этих схем.

В таком случае:

$$C_{eff} = C_0 + \phi\left\{(1-\phi)N^{-1} + \phi(C_1 - C_0)^{-1}\right\}^{-1}$$

$$S_{eff} = S_0 + \phi\left\{(1-\phi)H^{-1} + \phi(S_1 - S_0)^{-1}\right\}^{-1}$$

Учет ориентации неоднородностей

Вектор преимущественной ориентации неоднородностей:

$$\boldsymbol{m}(\phi,\theta) = \cos\theta\sin\phi\boldsymbol{e}_1 + \sin\theta\sin\phi\boldsymbol{e}_2 + \cos\phi\boldsymbol{e}_3$$

Функция ориентации неоднородностей:

$$\Psi_\lambda(\phi) = \frac{1}{2\pi}\left[(\lambda^2+1)e^{-\lambda\phi} + \lambda e^{-\lambda\frac{\pi}{2}}\right]$$

Осреднение тензорного базиса в случае случайного распределения направлений ($\lambda = 0$):

$$\langle \boldsymbol{T}_i \rangle = \frac{1}{2\pi}\int_\Phi \boldsymbol{T}_i d\Phi$$

Осреднение тензоров в тензорном базисе

$$\langle \boldsymbol{N} \rangle = \sum_i n_i \langle \boldsymbol{T}_i \rangle, \quad \langle \boldsymbol{H} \rangle = \sum_i h_i \langle \boldsymbol{T}_i \rangle$$

$$\langle \boldsymbol{A} \rangle = \sum_i a_i \langle \boldsymbol{T}_i \rangle = \sum_i \hat{a}_i \boldsymbol{T}_i$$

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{15}(7a_1 + a_2 + 3a_3 + 3a_4 + 0.5a_5 + 2a_6)$$

$$\hat{a}_2 = \frac{1}{15}(2a_1 + 6a_2 - 2a_3 - 2a_4 + 3a_5 + 2a_6)$$

$$\hat{a}_3 = \hat{a}_4 = \frac{1}{15}(6a_1 - 2a_2 + 4a_3 + 4a_4 - a_5 + a_6)$$

$$\hat{a}_5 = \frac{1}{15}(4a_1 + 12a_2 - 4a_3 - 4a_4 + 6a_5 + 4a_6)$$

$$\hat{a}_6 = \frac{1}{15}(8a_1 + 4a_2 + 2a_3 + 2a_4 + 2a_5 + 3a_6)$$

Эффективные тензоры упругих модулей и податливости

В результате получена модель для определения эффективных упругих модулей неоднородного материала, учитывающая особенности формы и ориентации неоднородностей, а также их взаимодействие друг с другом.

1. Схема Мори-Танаки:

$$C_{eff} = C_0 + \phi\langle N\rangle \cdot\cdot \big[(1-\phi)I + \phi(C_1 - C_0)^{-1} \cdot\cdot \langle N\rangle\big]^{-1}$$

$$S_{eff} = S_0 + \phi\langle H\rangle \cdot\cdot \big[(1-\phi)I + \phi(S_1 - S_0)^{-1} \cdot\cdot \langle H\rangle\big]^{-1}$$

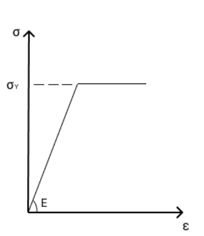
2. Схема Максвелла:

$$C_{eff} = C_0 + \phi\big\{(1-\phi)\langle N\rangle^{-1} + \phi(C_1 - C_0)^{-1}\big\}^{-1}$$

$$S_{eff} = S_0 + \phi\big\{(1-\phi)\langle H\rangle^{-1} + \phi(S_1 - S_0)^{-1}\big\}^{-1}$$

Пластичность

Используется модель идеального упругопластического тела ($\sigma_Y = const$).



В качестве критерия начала пластичности используется критерий Мизеса:

$$\frac{3}{2} dev(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \cdot dev(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_Y^2$$

Эффективный предел текучести

Предположение: пористость материала не влияет на значения деформаций, при которых начинается пластическое течение.

При условии начала пластического течения пористого материала ($\phi = 0$):

$$tr(\varepsilon^2) = \frac{1}{2\mu_0^2}\left[\tau_*^2 + \frac{(1-2\nu_0)^2}{6(1+\nu_0)^2} tr^2(\boldsymbol{\sigma})\right]$$

В случае ненулевой пористости:

$$tr(\varepsilon^2) = \boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot \left[(S_0 + \tilde{H}) \cdot\cdot (S_0 + \tilde{H})\right] \cdot\cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$\tilde{H} = (1-\phi)^{-1}\phi H = (1-\phi)^{-1}\phi \sum_i h_i T_i$

Эффективный предел текучести:

$$\tau_*^2 = \frac{1}{2}(A_1 tr^2(\boldsymbol{\sigma}) + A_2 dev(\boldsymbol{\sigma}) \cdot\cdot dev(\boldsymbol{\sigma}))$$

Верификация моделей для определения эффективных упругих модулей

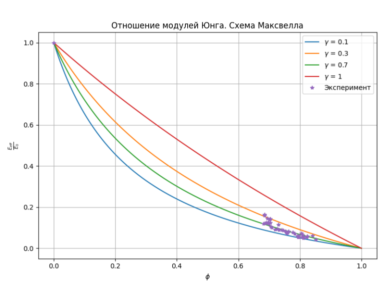
Верификация данных для модели определения упругих модулей проводится с использованием экспериментальных данных, полученных для пористого алюминия (AlMg1Si0.6), которые были описаны в работе [1]. Определение модуля Юнга в этой работе происходит по свободным колебаниям образца.

Цилиндрический образец с диаметром $d = 17$ мм и длинной $L = 300$ мм подвергался продольным вибрациям методом ударного молота [2]. Объем образца был вычислен по формуле $V = \pi \frac{d^2}{4} L$. В качестве формы неоднородности использовался сфероид с соотношением сторон $\gamma = \frac{b}{a} = 0.7$. Упругие модули матрицы: $E_0 = 70$ ГПа, $\nu_0 = 0.33$. Варьирование объемной доли производилось за счет изменения определяющего размера неоднородности.

[1] Sevostianov I., Kováčik J., Simančík F. Elastic and electric properties of closed-cell aluminum foams: Cross-property connection //Materials Science and Engineering: A. – 2006. – T. 420. – №. 1-2. – С. 87-99.

[2] Bruel K., Kjaer L. Mechanical Vibration and Shock Measurements, K //Larsen Son, Soborg. – 1980.

Верификация моделей для определения эффективных упругих модулей



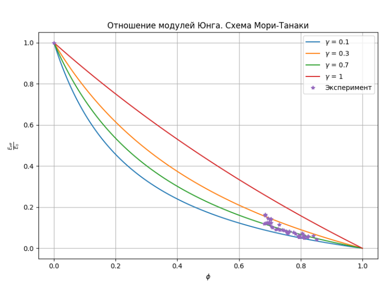


Figure 1: Зависимость отношения модулей Юнга в зависимости от пористости ϕ при разных γ.

Верификация моделей для определения эффективных упругих модулей

Отклонение $\delta = \sum_{i=1}^{N} \frac{|E^i_{exp} - E^i_{mod}|}{N}$, где $E_{index} = \frac{E_{eff}}{E_0}$ от экспериментальных данных при различных значениях соотношений сторон сфероида γ. Наилучшее сходство с экспериментальными данными получено при $\gamma = 0.7$, что говорит о корректности построенной модели. Отклонение в этом случае составило $\delta = 0.0113$. Отклонения моделей составило $\delta = 4e^{-17}$ отношений модулей Юнга.

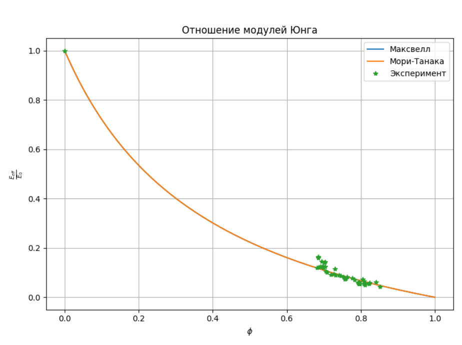


Figure 2: Зависимость отношения модулей Юнга в зависимости от пористости ϕ при $\gamma = 0.7$.

Верификация модели для определения эффективного предела текучести

Верификация данных проводится с использованием результатов численной симуляции нагружения пористого алюминия, описанной в работе [3]. Упругие модули матрицы и пор: $K_0 = 77.9$ ГПа, $\mu_0 = 24.9$ ГПа, $K_1 = 0.0001$ Па, $\mu_1 = 0.0001$ Па соответственно. Поры моделируются сферами ($\gamma = 1$). Число пор в процессе расчетов остается неизменным и равным 20. Репрезентативный объем $V = 1$м^3. Варьирование объемной доли производилось за счет изменения определяющего размера неоднородности. Для определения предела текучести использовался график напряженно-деформированного состояния материала при различных значениях пористости ϕ.

Пористость	0.048	0.113	0.15	0.221	0.268
Предел текучести, МПа	36.67	32.65	30.81	25.10	22.42

Table 1: Предел текучести при различных значениях пористости ϕ

[3] Zohdi T. I., Kachanov M., Sevostianov I. On perfectly plastic flow in porous material //International Journal of Plasticity. – 2002. – Т. 18. – №. 12. – С. 1649-1659.

Верификация модели для определения эффективного предела текучести

Среднее отклонение от результатов симуляции составляет:
$\delta = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\tau^i_{exp} - \tau^i_{mod}|}{\tau^i_{exp} N} = 0.381.$

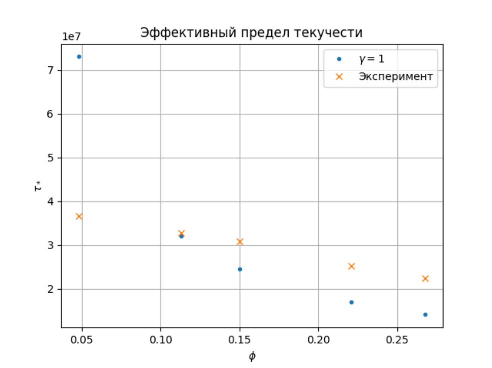


Figure 3: Зависимость предела текучести τ_* в зависимости от пористости ϕ при $\gamma = 1$

Заключение

- Построены модели для нахождения эффективных упругих модулей;
- Модели, использующие разные энергетические схемы учета взаимодействия, практически не имеют разницы в полученных результатах;
- Отклонение между моделями составило $\delta = 4e^{-17}$.
- Отклонение между моделями и экспериментом составило $\delta = 0.0113$;
- Построена модель для нахождения эффективного предела текучести;
- Отклонение между моделью и экспериментом составило $\delta = 0.381$;

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!